# Index


Pagina

*Commentationes*

Amos, A. T., and G. G. Hall: Self-consistent Perturbation Theory for Conjugated Molecules. II. Anisotropic Electric Polarizabilities of Conjugated Molecules . . . . 159
— Self-Consistent Perturbation Theory for Conjugated Molecules. III. Values of the Inductive Parameters for Aza and Methyl Substitution Derived from ESR Data . . 333

Baird, N. C., and M. A. Whitehead: Charge Density Distributions and Sigma Bond Inductive Effects in Hydrocarbons and Hydrocarbon Ions . . . . . 167

Carpentieri, M.: see Del Re, G., and U. Esposito . . . . . 36
Čížek, J.: Eléments matriciels de l'hamiltonien entre les états monoexcités et biexcités singulets . . . . . 292
Csizmadia, I. G., M. C. Harrison, J. W. Moskowitz, and B. T. Sutcliffe: Non-Empirical LCAO-MO-SCF-CI Calculations on Organic Molecules with Gaussian Type Functions. Part I. Introductory Review and Mathematical Formalism . . . . . 191
— —, and B. T. Sutcliffe: Non-Empirical LCAO-MO-SCF-CI Calculations on Organic Molecules with Gaussian Type Functions. Part II. Preliminary Investigations on Formyl Fluoride . . . . . 217

Del Re, G., U. Esposito, and M. Carpentieri: Bent Bonds, Hybridization, and the Maximum Localization Criterion . . . . . 36
Dingle, R., and R. A. Palmer: The Source of Spectral Band Intensity in Tris Ethylenediamine Complexes Tris Ethylenediamine Nickel (II) Nitrate . . . . . 249

Esposito, U.: see Del Re, G., and M. Carpentieri . . . . . 36

Fraga, S., G. Malli, and C. Valdemoro: Self-Consistent-Field Theory for Positive Ions 122
— see Malli, G. . . . . 54

Giambiagi, M. S. de: voir González, H. C., et M. Giambiagi . . . . . 257
Giambiagi, M.: voir González, H. C., et M. S. de Giambiagi . . . . . 257
González, H. C., M. S. de Giambiagi et M. Giambiagi: Quelques considérations sur la structure électronique du naphtalène . . . . . 257
Gouterman, M.: see Zerner, M., and H. Kobayashi . . . . . 363
Gründler, W.: s. Issleib, K. . . . . 64

Hall, G. G.: see Amos, A. T. . . . . 159
Hansen, A. E.: On the Evaluation of Electric and Magnetic Dipole Transition Moments in the ZDO Approximation . . . . . 341
Hansen, K. H.: Variations-Störungsrechnung bei Einzentren-Problemen . . . . . 87
— Molekülstruktur in der Theorie der Spinvalenz. II. Die Struktur der Hydride $MH_n$ . 437
— Eine einfache Ableitung der Slaterschen Abschirmkonstanten für äquivalente Elektronen . . . . . 268
—, u. G. Vierke: Zur Luminiszenz von Cr(3)-Verbindungen . . . . . 272
Harcourt, R. D.: Valency Structures for $N_2O_4$. Part II. . . . . 131
Harris, F. E., and R. Rein: Integral Approximations for Molecular Orbital Theory . . 73
Harrison, M. C.: see Csizmadia, I. G., J. W. Moskowitz, and B. T. Sutcliffe . . . . 191
— see Csizmadia, I. G., and B. T. Sutcliffe . . . . . 217
Hartmann, H., u. K. Hensen: Absolutberechnung der Normalfrequenzen des Hydrogendifluoridions . . . . . 20
—, u. E.-A. Reinsch: Schwingungsfrequenzen komplex gebundener Oxalatanionen . . 401

Pagina

HEILBRONNER, E., J.-P. WEBER, J. MICHL, and R. ZAHRADNÍK: The Electronic Spectra of Acenaphthylene and Fluoranthene. A Comment on the Classification of Electronic Spectra . . . . . 141
HENSEN, K.: s. HARTMANN, H. . . . . 20

I'HAYA, Y.: Magneto-Optical Rotation in Molecules. I. General Theory . . . . . 1
— Magneto-Optical Rotation in Molecules. II. The Verdet Constant for the Hydrogen Molecule . . . . . 12
ISSLEIB, K., u. W. GRÜNDLER: Berechnung der Moleküle $PH_n$ ($n = 1 - 4$) nach einem erweiterten MO-LCAO-Verfahren . . . . . 64

JERKUNICA, J. M.: see RANDIĆ, M., and L. KLASINC . . . . . 240
JULG, A.: Recherches complémentaires sur la théorie LCAO améliorée. I. Le problème de l'évaluation des termes $Wp$ et la réduction des intégrales de coeur ($A^+$, $b^2$) . . . 26

KAPUY, E.: Extension of the Separated Pair Theory . . . . . 281
KLASINC, L.: see RANDIĆ, M., and J. M. JERKUNICA . . . . . 240
KNOP, J. V.: s. PERKAMPUS, H.-H. . . . . 45
KOBAYASHI, H.: see ZERNER, M., and M. GOUTERMAN . . . . . 363

MALLI, G., and S. FRAGA: Physical Properties of Many-Electron Atomic Systems Evaluated from Analytical Hartree-Fock Functions. III. Electric Field Gradients and Quadrupole Coupling Constants . . . . . 54
— see FRAGA, S., and C. VALDEMORO . . . . . 122
MANNE, R.: Table of Sanibel (Spin Projection) Coefficients . . . . . 116
— An Approximate MO-LCAO-SCF Method Including Overlap. . . . . 299
— The Electronic Structure of Chlorine Trifluoride: An Approximate MO-LCAO-SCF Calculation . . . . . 312
MICHL, J.: see HEILBRONNER, E., J.-P. WEBER, and R. ZAHRADNÍK . . . . . 141
MOSKOWITZ, J. W.: see CSIZMADIA, I. G., M. C. HARRISON, and B. T. SUTCLIFFE . . . . 191

NAGAKURA, S.: see TANAKA, M. . . . . 320

PALMER, R. A.: see DINGLE, R. . . . . 249
PELLÉGATTI, A.: Recherches complémentaires sur la théorie LCAO améliorée. II. Réduction des intégrales ioniques et d'échange . . . . . 109
PERKAMPUS, H.-H., u. J. V. KNOP: SCF-CI-Berechnungen am Stilben . . . . . 45
PREUSS, H.: Die Bestimmung von Energiehyperflächen mehratomiger Systeme nach einer Interpolationsmethode mit Hilfe der Vorstellung der Atomassoziationen. III. Dreizentrensysteme . . . . . 413
— Die Bestimmung von Energiehyperflächen mehratomiger Systeme nach einer Interpolationsmethode mit Hilfe der Vorstellung der Atomassoziationen. IV. Spezielle $p$- und $pq$-Näherungen . . . . . 428

RANDIĆ, M., J. M. JERKUNICA, and L. KLASINC: Hybridization in Methylenecyclopropane and Related Molecules Having Exocyclic Double Bonds . . . . . 240
REIN, R.: see HARRIS, F. E. . . . . 73
REINSCH, E.-A.: s. HARTMANN, H. . . . . 401
RUTTINK, P. J. A.: Restriction on Approximations of Molecular Integrals . . . . . 83

SUTCLIFFE, B. T.: see CSIZMADIA, I. G., M. C. HARRISON, and J. W. MOSKOWITZ . . . . 191
— see CSIZMADIA, I. G., and M. C. HARRISON . . . . . 217

TANAKA, M., and S. NAGAKURA: Electronic Structures and Spectra of Adenine and Thymine . . . . . 320

VALDEMORO, C.: see FRAGA, S., and G. MALLI . . . . . 122
VIERKE, G.: s. HANSEN, K. H. . . . . 272
WEBER, J.-P.: see HEILBRONNER, E., J. MICHL, and R. ZAHRADNÍK . . . . . 141
WHITEHEAD, M. A.: see BAIRD, N. C. . . . . 167

ZAHRADNÍK, R.: see HEILBRONNER, E., J.-P. WEBER, and J. MICHL . . . . . 141
ZERNER, M., M. GOUTERMAN, and H. KOBAYASHI: Porphyrins. VIII. Extended Hückel Calculations on Iron Complexes . . . . . 363

Pagina

*Relationes*


Boer-Veenendaal, P. C. Den, and D. H. W. den Boer: A Bond Length — Bond Order Relation Derived from a Morse Type Sigma Electron Energy Curve . . . . . 354
Boer, D. H. W. den: see Boer-Veenendaal, P. C. den . . . . . 354
— see Smit, W. M. A. . . . . 358
Brown, D. A., and C. G. McCormack: The Electronic Structures of Substituted Benzenes and Borazines . . . . . 350
McCormack, C. G.: see Brown, D. A. . . . . 350
Dixon, W. T.: Some Consequences of the Magnetic Interaction of Protons and Electrons 359
Fraga, S.: see Malli, G. . . . . 278
Leclerc, J. C., and J. C. Lorquet: Note on the Significance of Walsh's Rules . . . . 91
Lorquet, J. C.: see Leclerc, J. C. . . . . 91
Malli, G., and S. Fraga: Physical Properties of Many-Electron Atomic Systems Evaluated from Analytical Hartree-Fock Functions. IV. Fermi Contact Interaction Term 278
Müller, H.: Bindungsverhältnisse und Elektronenverteilung im Trijodid-Anion $\overline{J_3}$ im Modell der freien Elektronen . . . . . 445
Smit, W. M. A., and D. H. W. den Boer: Free Valence Numbers of Carbon . . . . . 358


*Annotationes*


Ažman, A., Z. Bohte, and A. Ocvirk: $\omega$-Modification of Extended Hückel-Theory . . . 189
Baumann, H., and E. Heilbronner: The Kinetic Energy Components of LCAO-Molecular Orbitals: A Comment on the "Electron-in-a-Box"-"LCAO-MO-Model" Analogy 95
Bohte, Z.: see Ažman, A., and A. Ocvirk . . . . . 189
Heilbronner, E.: see Baumann, H. . . . . 95
Ocvirk, A.: see Ažman, A., and Z. Bohte . . . . . 189
White, R. J.: Perimetric Coordinates for Four Particles. . . . . 450
Willett, R. D.: A Comment on the Bonding in $XeF_6$ . . . . . 186


*Errata*


Baird, N. C., and M. A. Whitehead: Ionic Character . . . . . 190
— see Whitehead, M. A., and M. Kaplansky . . . . . 190
Hansen, K. H., u. G. Vierke: Zur Lumineszenz von Cr(3)-Verbindungen . . . . . 452
Harris, F. E., and R. Rein: Integral Approximations for Molecular Orbital Theory 452
Kaplansky, M.: see Whitehead, M. A., and N. C. Baird . . . . . 190
Rein, R.: see Harris, F. E. . . . . 452
Vierke, G.: s. Hansen, K. H. . . . . 452
Whitehead, M. A., N. C. Baird, and M. Kaplansky: Group Orbital Electronegativities 190
— see Baird, N. C. . . . . 190
Zaalberg, M. M.: The Rotation Barrier of Ethane-Like Molecules . . . . . 362


*Recensio*


Ridd, J. H.: Studies on Chemical Structure and Reactivity (Ref. E. A. Reinsch) . . . 452

## Theoretica Chimica Acta

**In order to avoid delay in publication, this journal is issued at indefinite intervals, according to the material received, and consists of loose numbers, for subsequent assembly in volumes. The price is DM 48.— per volume.**

**Special attention is drawn to the fact that sole copyright for all languages and countries is transferred to the publishers immediately the manuscript is accepted and published by them. It is a fundamental condition that no manuscript submitted shall have been or will be published elsewhere either at home or abroad.**

**Unless special permission has been granted by the publishers, no photographic reproductions, microfilms, microphotos or other reproductions of a similar nature may be made of the journals, of individual contributions contained therein or of extracts therefrom.**

**The reproduction of registered names, trade marks, etc. in this journal, even if not specially indicated, does not warrant the assumption that such names, as defined by the laws affecting protection of trade marks, etc., may be regarded as uncontrolled and therefore for the free use of everybody.**

---

**Die Zeitschrift erscheint im Interesse rascher Veröffentlichung nach Maßgabe des eingehenden Materials zwanglos in Heften, die zu Bänden vereinigt werden. Der Preis des Bandes beträgt DM 48,—.**

**Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, sie auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e.V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,30 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.***

**Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinn der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.**

---

**Afin d'assurer la publication la plus rapide possible, la revue paraît à intervalles non réguliers, dans la mesure des articles reçus, sous forme de fascicules séparés qui seront reliés en volumes. Le prix de chaque volume est de 48 DM.**

**L'attention est tout particulièrement attirée sur le fait qu'une fois le manuscrit accepté et publié par les éditeurs, l'unique copyright pour tous pays et toutes langues leur est réservé. Ne doivent être en principe envoyés que les ouvrages qui n'ont jamais été et ne seront jamais publiés ni dans le pays même de l'auteur ni à l'étranger.**

**En outre, il n'est pas permis sans l'autorisation expresse des éditeurs de faire des reproductions photographiques, des microfilms, des microphotos, etc. . . ., des revues publiées, des communications individuelles ou d'extraits de ces dernières.**

**La reproduction dans cette revue de marques déposées, marques de fabrique, désignations de marchandises, etc., même sans indication spéciale, n'autorise pas à croire que ces noms définis par la législation commerciale sur les marques et la propriété industrielle puissent être laissés au libre usage de chacun.**

Pagina

*Commentationes*

ZERNER, M., M. GOUTERMAN, and H. KOBAYASHI: Porphyrins. VIII. Extended Hückel Calculations on Iron Complexes . . . . . 363

HARTMANN, H. und E.-A. REINSCH: Schwingungsfrequenzen komplex gebundener Oxalatanionen . . . . . 401

PREUSS, H.: Die Bestimmung von Energiehyperflächen mehratomiger Systeme nach einer Interpolationsmethode mit Hilfe der Vorstellung der Atomassoziationen. III. Dreizentrensysteme . . . . . 413

— Die Bestimmung von Energiehyperflächen mehratomiger Systeme nach einer Interpolationsmethode mit Hilfe der Vorstellung der Atomassoziationen. IV. Spezielle $p$- und $pq$-Näherungen . . . . . 428

HANSEN, K. H.: Molekülstruktur in der Theorie der Spinvalenz. II. Die Struktur der Hydride $MH_n$ . . . . . 437

*Relatio*

MÜLLER, H.: Bindungsverhältnisse und Elektronenverteilung im Trijodid-Anion $J_3^-$ im Modell der freien Elektronen . . . . . 445

*Annotatio*

WHITE, R. J.: Perimetric Coordinates for Four Particles. . . . . 450

*Errata*

HANSEN, K. H., u. G. VIERKE: Zur Lumineszenz von Cr(3)-Verbindungen . . . . . 452

HARRIS, F. E., and R. REIN: Integral Approximations for Molecular Orbital Theory 452

*Recensio*

RIDD, J. H.: Studies on Chemical Structure and Reactivity (Ref. E. A. REINSCH) . . . 453

Springer-Verlag, Berlin · Heidelberg · New York
Druck: Carl Ritter & Co., Wiesbaden
Printed in Germany
Verantwortlich für den Anzeigenteil: Edgar Seidler, 1 Berlin 31 (Wilmersdorf), Heidelberger Platz 3